Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア

未知サンプルの解析

ファミリアリゼーション ガイド

Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2011

このマニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

マニュアル番号

G3335-96109

エディション

第 1 版、2011 年 7 月

Printed in USA

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Boulevard
Santa Clara, CA 95051 USA

保証

このマニュアルの内容は「現状のまま」提供されることを前提としており、将来の改訂版で予告なく変更されることがあります。また、Agilent は適用される法律によって最大限許される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関し、商品の適格性や特定用途に対する適合性への暗黙の保障を含み、また、それに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず、一切いたしません。Agilent は、このマニュアルまたはこのマニュアルに記載されている情報の提供、使用または実行に関連して生じた過誤、付随的損害あるいは間接的損害に対する責任を一切負いません。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がここに記載されている条件と矛盾する場合は、別に合意された契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

本書で扱っているハードウェアおよびソフトウェアは、ライセンスに基づき提供されており、それらのライセンス条項に従う場合のみ使用または複製することができます。

権限制限の説明文

ソフトウェアが米国政府を主要または副次的な契約者とする場合、このソフトウェアは、DFAR 252.227-7014（1995 年 6 月）で規定される「商用コンピュータソフトウェア（Commercial computer software）」、FAR 2.101(a) で規定される「商用項目（commercial item）」、FAR 52.227-19（1987 年 6 月）で規定される「制限されたコンピュータソフトウェア（Restricted computer software）」、あるいは同等の代理人規則または契約条項に従って配布およびライセンス供与されます。ソフトウェアの使用、複製、または公開は、Agilent Technologies の標準商用ライセンス条項に従うものとし、米国政府の国防総省以外の部局は、FAR 52.227-19(c)(1-2)（1987 年 6 月）で規定される制限を超える権利を得ないものとします。米国政府のユーザーは、すべてのテクニカルデータに適用される FAR 52.227-14（1987 年 6 月）または DFAR 252.227-7015(b)(2)（1995 年 11 月）で規定される制限を超える権利を得ないものとします。

安全にご使用いただくために

注意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行されない場合、または指示を順守されない場合に、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起しています。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、**注意**を無視して先に進んではなりません。

警告

警告は、取り扱い上、危険があることを示します。これは、正しく実行されない場合、または指示が順守されない場合に、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起しています。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

目次

このガイドでは... 5

実習を開始する前に 6

インストールディスクからハードディスクへのファイルのコピー 6

未知サンプルの解析ソフトウェアの起動 6

新規解析の作成 7

MassHunter 定量分析からのデータのインポート 8

メソッドの読み込み 9

未知サンプルの解析に使用するライブラリの選択 10

結果の解析と確認 12

レポートの作成 14

このガイドでは...

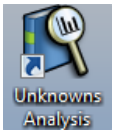
『ファミリアリゼーションガイド』は、未知サンプルの解析プログラムをステップバイステップで効果的に学習できる実習形式のマニュアルです。なお、ビデオは英語での提供となっております。これらの実習は、システムインストールディスクに収録されているデモ用の解析ファイル、メソッドファイル、ライブラリファイルを使用して実行することも、実際に測定したデータを使用して実行することもできます。

実習を開始する前に

インストールディスクからハードディスクへのファイルのコピー

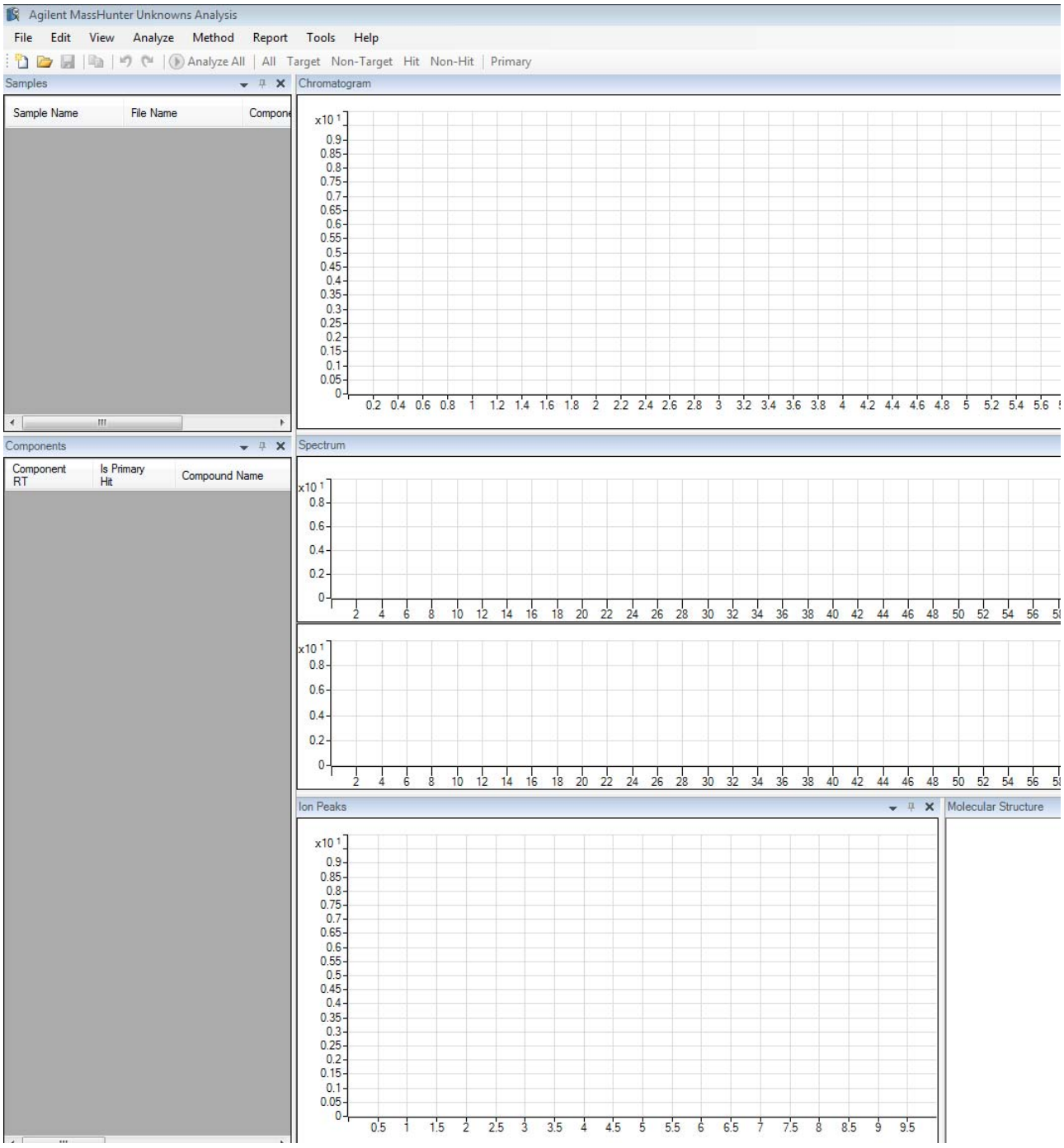
1. MassHunter 定量分析インストール DVD を PC に挿入します。
2. DVD ドライブの **\Data** ディレクトリに移動します。
3. フォルダが圧縮形式の場合、データファイルを ZIP 形式から解凍します。
4. インストールディスクから **Data** フォルダを、非圧縮形式でご使用のハードディスクの任意の場所にコピーします。このフォルダには、実習に必要なデータファイル、メソッドファイル、ライブラリファイルが含まれています。システム上にすでにサンプルデータファイルが存在していても、そのデータがディスク上のオリジナルと同一であることが確認できない場合は、使用しないでください。既存のサンプルデータファイルがインストールディスク上のオリジナルファイルと正確に一致しないと、実習中に得られた結果はこのガイドで示される結果と一致しなくなります。

未知サンプルの解析ソフトウェアの起動



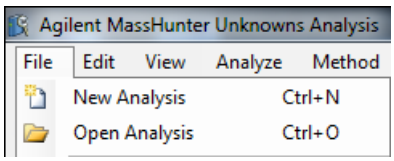
1 [**未知サンプルの解析**] デスクトップアイコン を選択します。開始スクリーンは以下に示すようにブランクになります。

2 プログラムが前回終了したときの状態で起動します。ウィンドウに解析が表示されている場合、**[ファイル] > [解析を閉じる]** を選択して、下図のように空白の開始画面にします。

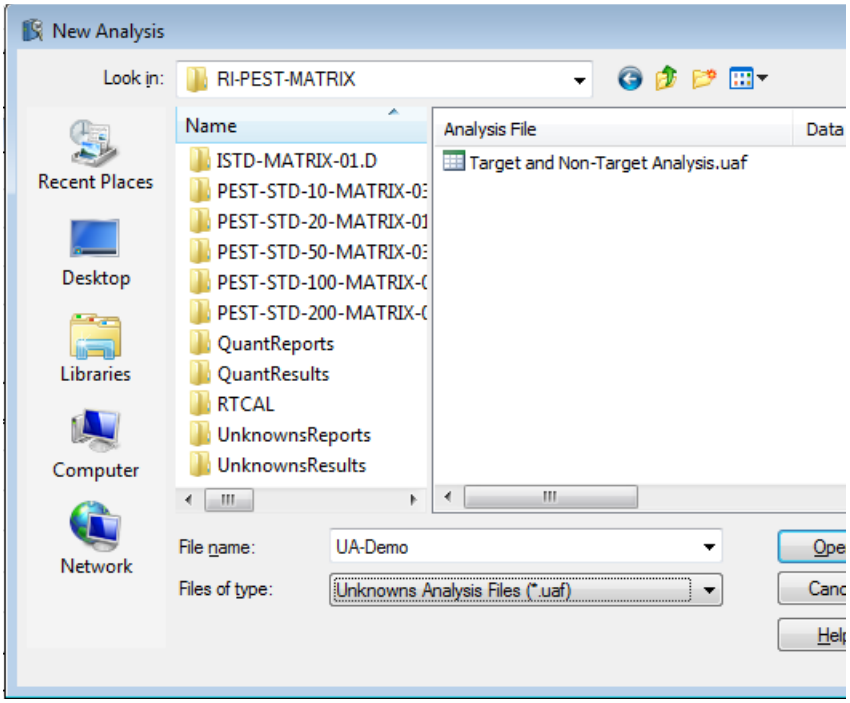


新規解析の作成

1 メニューバーから、**[ファイル] > [新規解析]** を選択します。



2 **[新規解析]** ダイアログボックスで、解析を保存するフォルダに移動します。**(RI-PEST-MATRIX)**



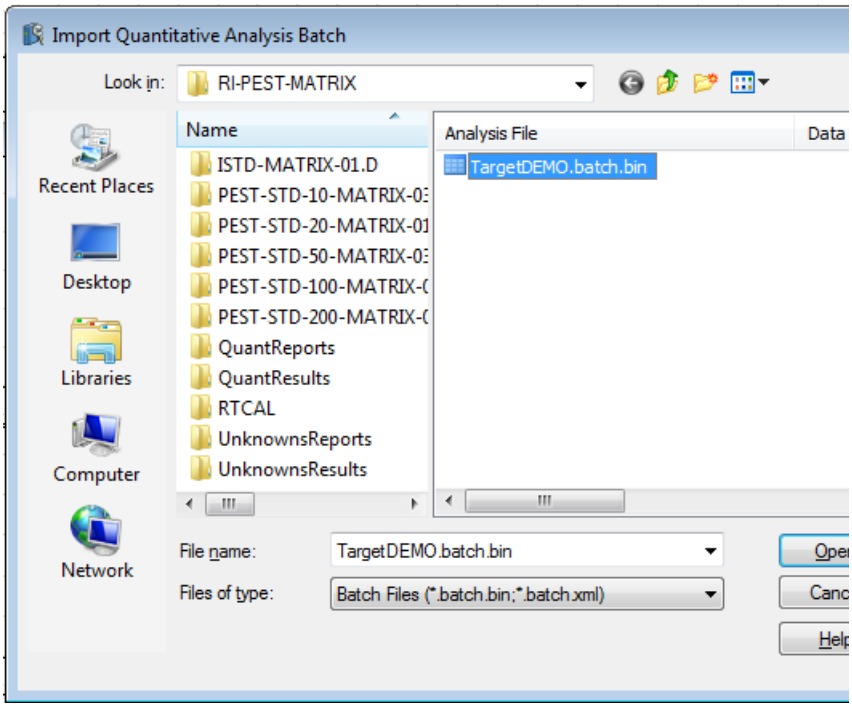
3 **[ファイル名:]** フィールドに、解析の名前を入力します。この実習では、**UA-demo.uaf** というファイル名を使用します。

4 **[開く]** を選択します。新しい解析が作成されて開かれ、タイトルバーに名前が表示されます。

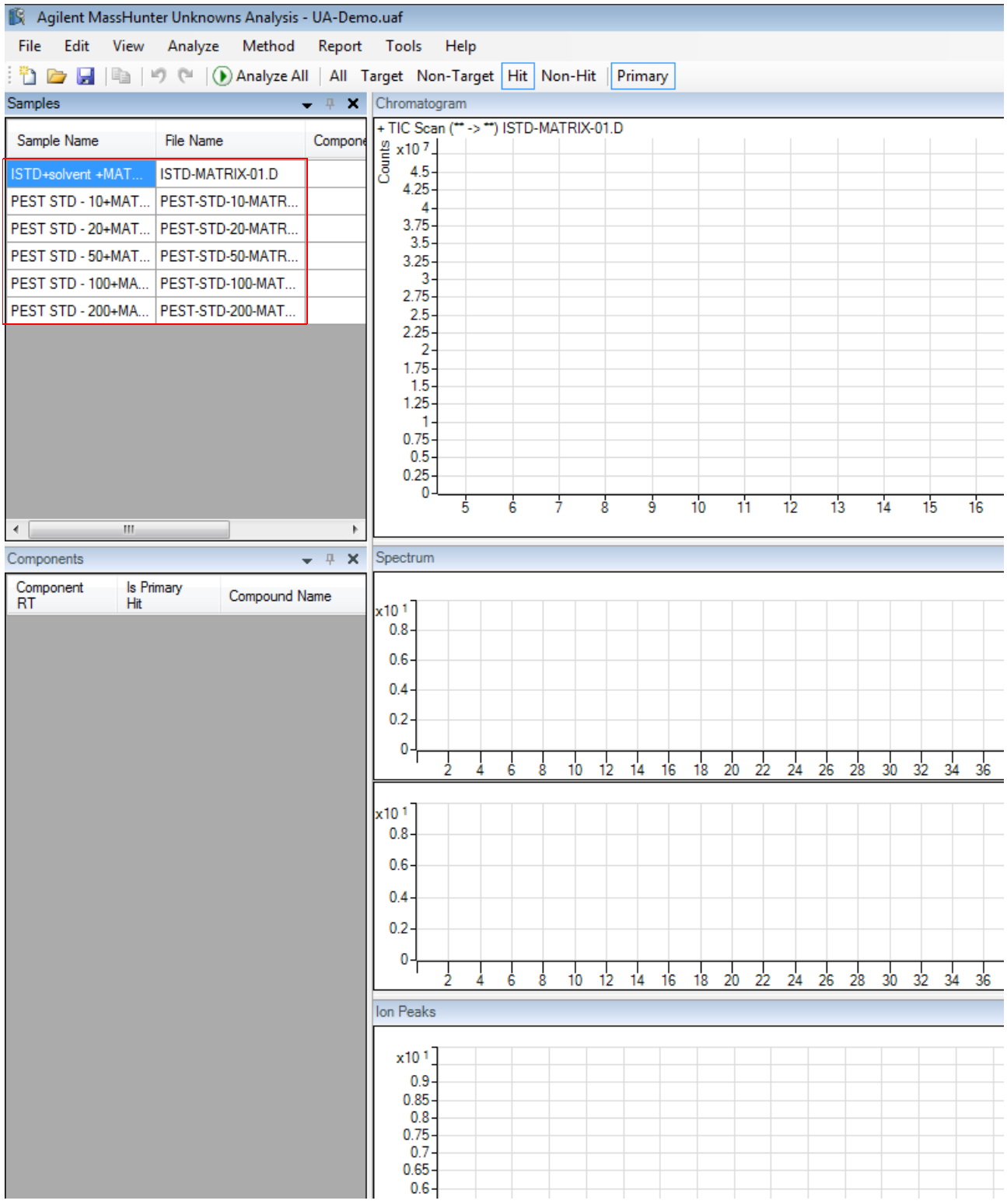
MassHunter 定量分析からのデータのインポート

1 メニューバーから、**[ファイル] > [定量分析のインポート]** を選択します。[**定量分析バッチのインポート**] ダイアログボックスが開きます。

2 **MassHunter/Data/RI-PEST-MATRIX** に移動し、**TargetDEMO.batch.bin** を選択します。

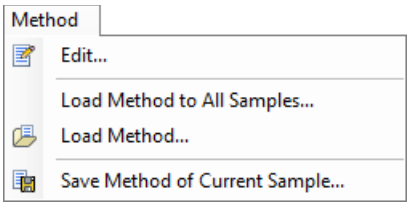


3 [**開く**] を選択します。ダイアログボックスが閉じられ、**[サンプル]** テーブルにサンプルが追加されます。

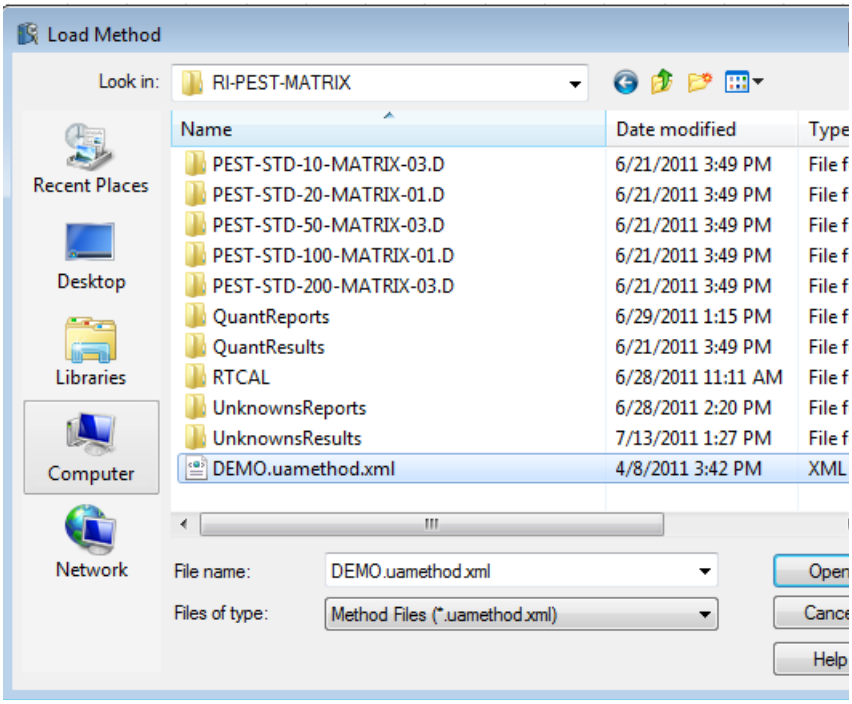


メソッドの読み込み

1 メニューバーから、**[メソッド] > [すべてのサンプルに対してメソッドを読み込み...]** を選択します。



2 **[メソッドの読み込み]** ダイアログボックスで、**MassHunter/Data/RI-PEST-MATRIX** に移動し、**DEMO.uamethod** を選択します。



3 **[開く]** を選択します。ダイアログボックスが閉じられ、解析のすべてのサンプルにメソッドが読み込まれます。

未知サンプルの解析に使用するライブラリの選択

1 メニューバーで、**[メソッド] > [編集...]** を選択します。[メソッド] ダイアログボックスが、前回閉じられたビューで開きます。この実習では、標準ビューを使用します（図 1）。詳細ダイアログボックス（図 2）が表示されている場合、**[標準]** を選択して標準ビューに切り替えます。

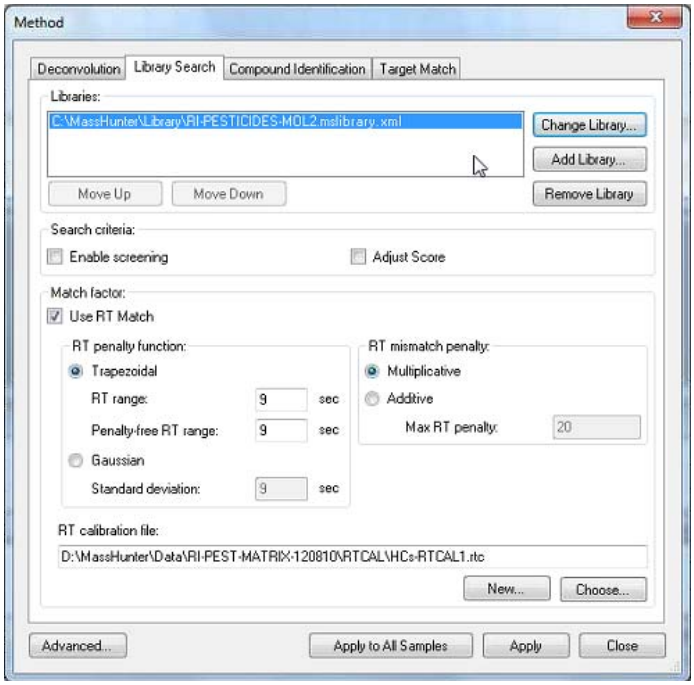


図 1 [メソッド] ダイアログボックスの標準ビュー

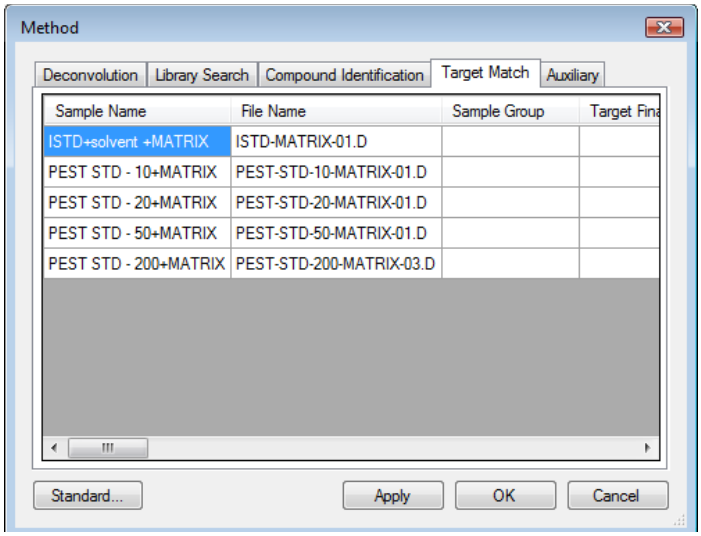


図 2 [メソッド] ダイアログボックスの詳細ビュー

2 [**ライブラリ検索**] タブを選択します。

3 [**ライブラリ**] エリアで、[**ライブラリの変更...**] を選択します。

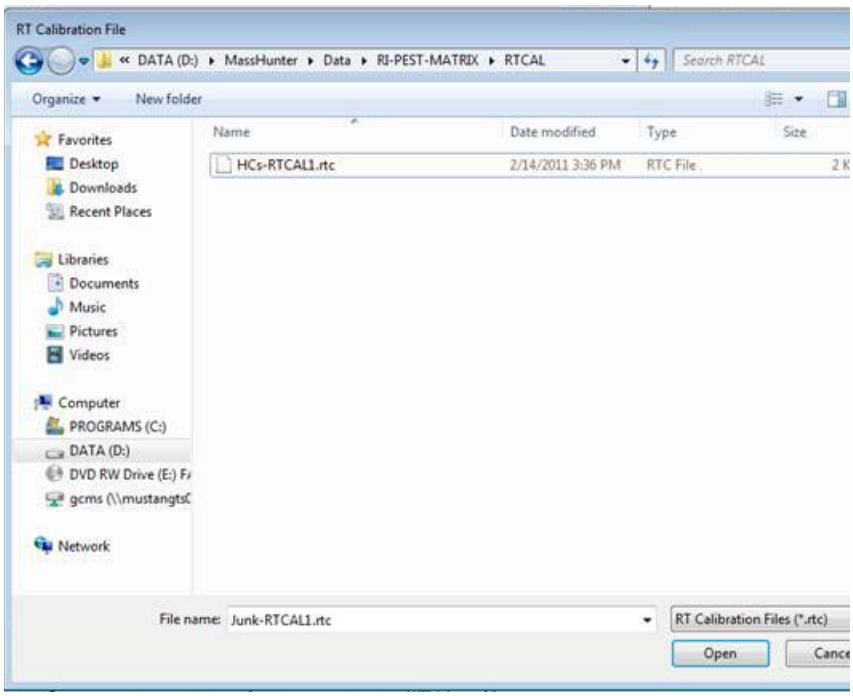
4 開くダイアログボックスで、データフォルダまで移動し RI-PESTICIDES_MOL2.mslibrary.xml を選択します。データフォルダはハードディスクにコピーされたものです。6ページのステップ4を参照してください。

5 [**開く**] を選択します。ダイアログボックスが閉じられ、[**メソッド**] ダイアログボックスの [**ライブラリ**] リストにライブラリが追加されます（12 ページの図 1 を参照してください）。

6 RT キャリブレーションファイルエリアで、選択を選びます。

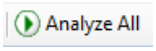
7 RT キャリブレーションファイル ダイアログボックスで、データフォルダまで移動し HCs-RTCal1.rtc を選択します。

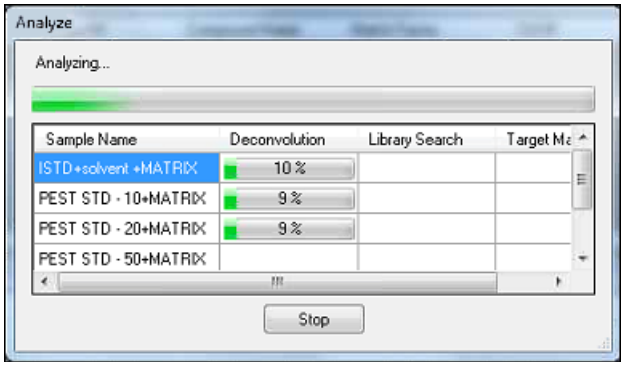
8 [**メソッド**] ダイアログボックスで、[**すべてのサンプルに適用**] を選択し、[**閉じる**] を選択します。



結果の解析と確認

1 メニューバーから **[解析] > [すべて解析]** を選択するか、次のボタンを選択します。





2 メニューバーから、**[表示] > [レイアウト] > [すべて - 標準]** を選択します。

3 **[サンプル]** テーブルからサンプルを選択します。

4 次のいずれかのツールバーボタンを選択します。

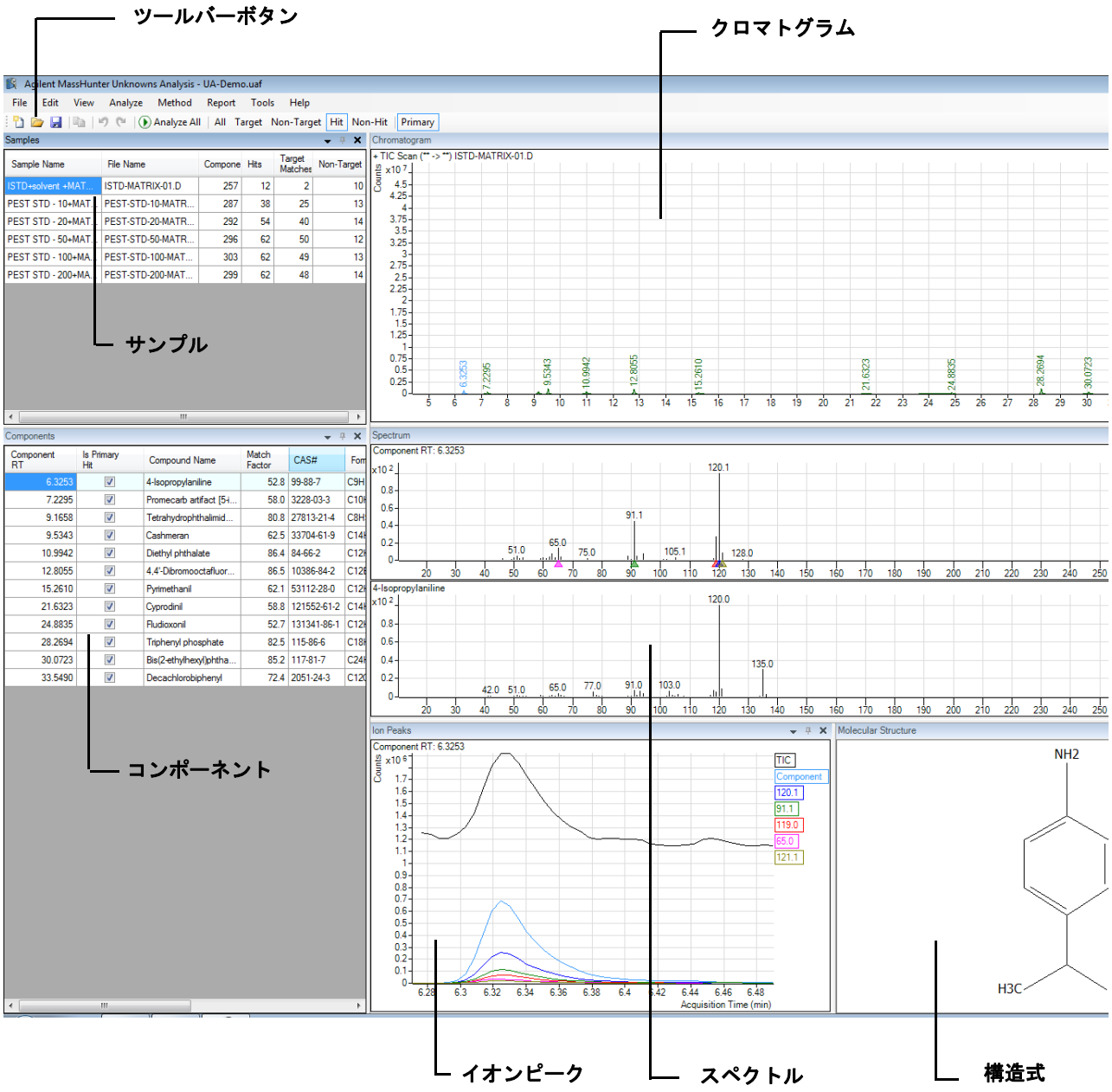
- **すべて** - すべてのピークを表示します。
- **ターゲット** - 定量バッチにも存在するピークを表示します。
- **非ターゲット** - 定量バッチに存在しないピークを表示します。
- **ヒット** - ライブラリにも存在するピークを表示します。
- **非ヒット** - ライブラリに存在しないピークを表示します。
- **主要** - 最も一致するものを表示します。

5 **[コンポーネント]** テーブルで、**[コンポーネント RT]** 列からコンポーネントを選択します。

6 選択したコンポーネントの **[スペクトル]**、**[イオンピーク]**、**[構造式]** を表示します。

[スペクトル] ウィンドウで、上に表示されるスペクトルはコンポーネントからのもの、下に表示されるスペクトルはライブラリからのものです。[コンポーネント]テーブルの [一致ファクタ] は、2 つのスペクトルがどの程度似通っているかを示しています。

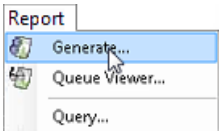
構造式はライブラリからのものです。



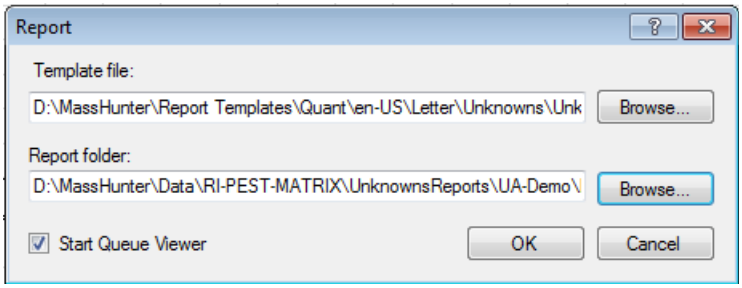
7 解析を保存するには、**[ファイル] > [解析の保存]** を選択します。

レポートの作成

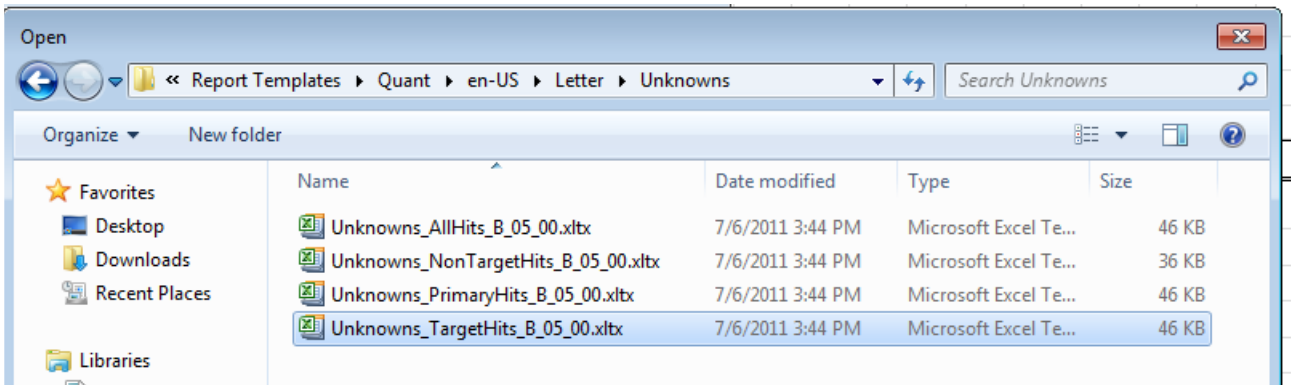
1 メニューバーから、**[レポート] > [作成]** を選択します。



2 **[レポート]** ダイアログボックスで、**[テンプレートファイル]** の下で **[参照]** を選択します。



3 **[開く]** ダイアログボックスで、**MassHunter > Report Templates> Quant>en-US>Letter>Unknowns** を参照します。この実習では、以下を選択します。**Unknowns_TargetHits_B-05_00.xltx**

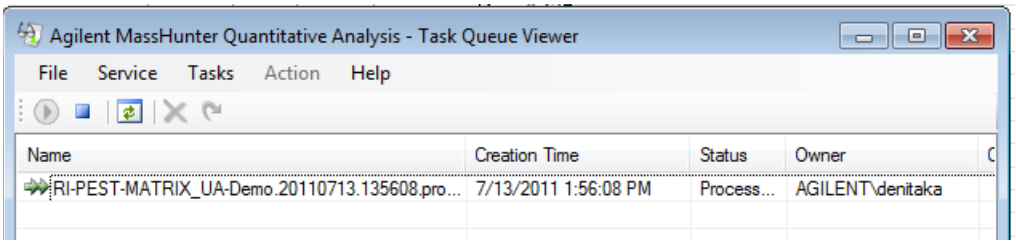


4 **[レポート]** ダイアログボックスで、**[レポートフォルダ]** の下で **[参照]** を選択します。

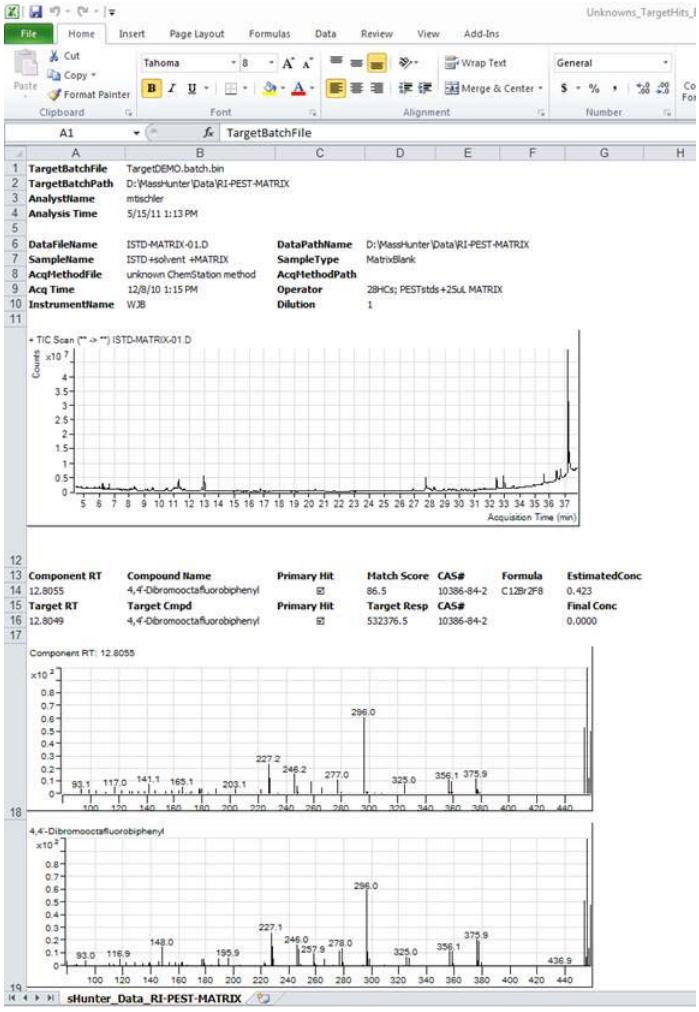
5 **[開く]** ダイアログボックスで、レポートを保存する場所を参照し、**[開く]** を選択します。デフォルトの場所は、解析が保存されているのと同じ場所です。

6 **[レポート]** ダイアログボックスで、**[OK]** を選択します。

7 [**タスクキュー**] ビューアが表示されます。



8 タスクが完了したら、[**タスクキュー**] ビューアで、**[アクション] > [開く "未知 サンプルの解析レポート名 "]** を選択します。レポートが Excel で開きます。通常の Excel の機能を使用して、レポートの印刷、保存、変更を実行できます。



9 レポートを閉じます。

10 プログラムを終了するには、**[ファイル] > [終了]** を選択します。

Agilent Technologies

© Agilent Technologies, Inc.

Printed in USA

第 1 版、2011 年 7 月